Estimation du paramètre du champ de Ising
Fonction de partition

Jean-François Giovannelli

Laboratoire d'Intégration du Matériau au Système, Équipe Signal-Image,
Université de Bordeaux 1, 33405 Talence, France, E-mail : `Giova@IMS-Bordeaux.fr`

Résumé – Le papier propose de nouveaux estimateurs du paramètre du champ de Ising. Ils sont fondés sur une expression explicite et relativement simple de la fonction de partition du champ. Celle-ci est connue de la physique statistique depuis longtemps [1], mais, à notre connaissance, elle n'a jamais été exploitée pour des méthodes d'estimation du paramètre. Tirant partie de ce résultat, le papier propose plusieurs estimateurs fondés sur la vraisemblance exacte et concurrents de stratégies existantes fondées sur la pseudo-vraisemblance. Une étude numérique en terme de biais et variance en fonction de la vraie valeur du paramètre montre que les estimateurs proposés offrent des performances largement meilleures que celui fondé sur la pseudo-vraisemblance.

Abstract – We propose new estimation methods for the Ising field parameter based on an explicit expression for the partition function. This expression is known for a long time [1], but, to the best of our knowledge, it has never been used for parameter estimation. The paper takes advantage of this result to develop point estimates through the exact likelihood. A numerical evaluation is proposed based on bias and variance : the proposed estimates are shown to outperform the existing one based on pseudo-likelihood.

Mots-clés – Champ de Ising, fonction de partition, paramètre de température, estimation bayésienne.

1 Champ de Potts et Ising pour les problèmes inverses

La motivation sous-jacente au présent papier concerne les problèmes inverses et l'imagerie. Pour ces problèmes, les stratégies bayésiennes ont connu un essor important car elle permettent de fusionner diverses sources d'information, en particulier des données mesurées et des propriétés recherchées pour les images. En ce sens, le fameux papier [2] introduit des variables binaires pour modéliser les contours d'une image (voir aussi [3, 4]) et les papiers [5, 6] introduisent un champ de Ising/Potts pour les étiquettes de régions. Plus récemment, les progrès concernant les outils de l'échantillonnage stochastique et la puissance des calculateurs ont poussé l'exploitation de ces modèles pour des problèmes de reconstruction-segmentation dans des domaines variés [7, 8].

La construction d'une solution complète nécessite le réglage des paramètres qui pilotent les lois de probabilité et les solutions génériques reposent sur des outils statistiques. Ces stratégies se heurtent cependant à une difficulté majeure : la fonction de partition des champs est en général inconnue et dépend des paramètres d'une manière très compliquée [9, Part.VI], [10, Ch.8]. Le cas gaussien fait naturellement exception à cela. Par ailleurs, [11] formule une proposition originale pour un champ non-gaussien qui fait également exception. Une troisième exception concerne le champ de Ising : la fonction de partition est connue de la litérature de la physique statistique [1]. La contribution consiste à extraire ce résultat de [1] et à l'exploiter pour estimer le paramètre du champ, ce qui, à notre connaissance, n'a jamais été fait.

Le papier est organisé comme suit. La Section 2 introduit les notations et présente la forme explicite de la fonction de partition. La Section 3 propose plusieurs estimateurs et une évaluation comparative. Conclusions et perspectives sont présentées dans la Section 4.

2 Champ de Ising et fonction de partition

Le champ de Ising est un champ de Markov binaire piloté par un paramètre $\beta \in \mathbb{R}_+$. Il est considéré ici sur un réseau fini $N \times N$ et noté $\boldsymbol{X} = [X_s\,,\, s \in \mathbb{N}_N^2]$, où $\mathbb{N}_N = \{1, 2, \ldots, N\}$. Notons $P = N^2$ le nombre de sites. Pour une configuration $\boldsymbol{x}_0$, la probabilité s'écrit :

$$\Pr\left[\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}_0 \,|\, \beta\,\right] = Z_P(\beta)^{-1}\ \exp\left[\,2P\beta\,\rho\,(\boldsymbol{x}_0)\right]\ . \tag{1}$$

Le potentiel décrit la structure de voisinage et les interactions entre pixels :

$$2P\,\rho\,(\boldsymbol{x}) = \sum_{r\sim s} \delta\,(x_r, x_s)$$

où δ est le symbole de Kronecker et $\sim$ symbolise la relation de voisinage en 4-connexité.

La fonction de partition Z_P fait apparaître une somme sur toutes les configurations du champ

$$Z_P(\beta) = \sum_{\boldsymbol{x}} \exp\left[\,2P\beta\,\rho\,(\boldsymbol{x})\,\right]\ , \tag{2}$$

qui s'étend sur 2^P termes ce qui est énorme.

D'un point de vue statistique, la loi Eq. (1) est dans la famille exponentielle : β est le paramètre naturel et $\rho\,(\boldsymbol{x})$ est une statistique suffisante. L'inference sur β repose sur l'expression complète de la loi y compris sa fonction de partition. Son calcul théorique semble une tache insurmontable, mais une solution a été proposée par Onsager [1]. Sa contribution, remarquable, fournit la fonction de partition à la fois dans le cas du réseau fini et du réseau infini ($N = +\infty$).

Afin de simplifier certaines écritures, on pose $\widetilde{Z}_P = \log Z_P(\beta)/P$ la log-partition par pixel et $\bar{Z}_P = \log Z_P(\beta)/2P$ la log-partition par clique et le résultat clé est celui de Eq. (95) dans [1].

Après quelques manipulations, on montre que la log-partition prend la forme :

$$\widetilde{Z}_P(\beta) = \beta + \frac{1}{2}\log\left[\,2\sinh\beta\,\right] + \frac{1}{2P}\sum_{p=1}^{P}\operatorname{acosh}\Delta_p(\beta) \tag{3}$$

où acosh est la fonction cosinus hyperbolique inverse et $\Delta_p(\beta) = v(\beta) - C_p$ avec

$$v(\beta) = \frac{\cosh^2\beta}{\sinh\beta} \quad \text{and} \quad C_p = \cos\frac{2p-1}{2P}\pi\,.$$

Pour $\beta \in \mathbb{R}_+$, on a $v(\beta) \in [2, +\infty[$, donc $\Delta_p(\beta) \in [1, +\infty[$ et donc $\widetilde{Z}_P(\beta)$ est bien défini. Ainsi, la formidable somme Eq. (2), devient une somme unidimensionnelle et finie Eq. (3), ce qui est considérablement plus simple.

On obtient aisément les deux premières dérivées de $\widetilde{Z}_P$, par dérivation simple de Eq. (3) :

$$\widetilde{Z}'_P(\beta) = 1 + \frac{1}{2}\frac{\cosh\beta}{\sinh\beta} + \frac{1}{2P}\sum_{p=1}^{P}\frac{v'(\beta)}{\overline{\Delta}_p(\beta)^{1/2}}\,, \tag{4}$$

$$\widetilde{Z}''_P(\beta) = \frac{-1}{2\sinh^2\beta} + \frac{1}{2P}\sum_{p=1}^{P}\frac{v''(\beta)\overline{\Delta}_p(\beta) - v'(\beta)^2\Delta_p(\beta)}{\overline{\Delta}_p(\beta)^{3/2}}\,. \tag{5}$$

Dans ces équations $\overline{\Delta}_p(\beta) = \Delta_p(\beta)^2 - 1$ et les dérivées de $v(\beta)$ s'écrivent :

$$v'(\beta) = \cosh\beta - \frac{\cosh\beta}{\sinh^2\beta} \quad \text{et} \quad v''(\beta) = \sinh\beta + \frac{1+\cosh^2\beta}{\sinh^3\beta}\,.$$

Une singularité apparaît dans la dérivée seconde pour la valeur dite critique β_{c} lorsque l'argument de acosh dans Eq. (3) devient $\Delta = 1$.

– Pour $P \in \mathbb{N}^*$ et $\beta \in \mathbb{R}_+$, on a clairement $\Delta > 1$. Comme $\Delta \neq 1$, $\widetilde{Z}_P(\beta)$ de Eq. (3) et ses dérivées Eq. (4) et Eq. (5) restent finies.
– A l'inverse, pour $P = +\infty$, la valeur $\Delta = 1$ est atteinte pour $v(\beta) = 2$ ce qui provoque une singularité dans la seconde dérivée de $\widetilde{Z}(\beta)$, Eq. (5).

La valeur critique β_{c} satisfait $v(\beta_{\mathrm{c}}) = 2$ et on déduit aisément $\beta_{\mathrm{c}} = \log\left[\,1+\sqrt{2}\,\right] \sim 0.88$. Ce résultat est connu et de la litérature concernant la physique statistique et de la litérature concernant les champs de Markov [12, 13] avec des conventions et notations différentes. A cette valeur $\beta = \beta_{\mathrm{c}}$, on a $v(\beta_{\mathrm{c}}) = 2$, $v'(\beta_{\mathrm{c}}) = 0$ et $v''(\beta_{\mathrm{c}}) = 4$.

3 Estimation du paramètre

L'estimation repose sur une densité a posteriori bâtie à partir de la vraisemblance (1) et d'une densité a priori uniforme sur l'intervalle[1] $[0, B]$. Dans les développements numériques

[1]Le cas $B = +\infty$ est considéré dans un travail complémentaire [14] : la densité a posteriori ne dégénère pas même si les densités a priori et jointe dégénèrent.

présentés, on fixe $B = 2$ car de plus grandes valeurs de β fournissent presque toujours des configrations uniformes.

Afin de procéder à l'estimation, on introduit la Co-Log-Posterior-Vraisemblance (CLPV)

$$J(\beta) = -\frac{1}{2P} \log f(\beta \,|\, \boldsymbol{x}_0) = \bar{Z}_P(\beta) - \beta\,\rho(\boldsymbol{x}_0) \tag{6}$$

à une constante additive et multiplicative (positive) près. Les deux premières dérivées

$$J'(\beta) = \bar{Z}'_P(\beta) - \rho(\boldsymbol{x}_0) \tag{7}$$
$$J''(\beta) = \bar{Z}''_P(\beta) \tag{8}$$

présentent des formes attendues puisque la loi est dans la famille exponentielle. En conséquence, CLPV est convexe et la densité a posteriori est unimodale.

Une autre conséquence, d'importance, repose sur le fait que $\bar{Z}''_P(\beta)$ est l'information de Fisher (par clique) : une configuration observée est d'autant plus informative (à propos du paramètre β) que le paramètre β est proche de la valeur critique β_c, puisque $\bar{Z}''_P(\beta)$ devient grand quand β est proche de β_c.

Trois estimateurs ponctuels sont approchés numériquement : moyenne a posteriori (PMoy), médiane a posteriori (PMed) et maximiseur a posteriori (PMax, *i.e.*, le MAP[2]). L'estimateur existant standard par maximum de pseudo-vraisemblance (PVMax) est aussi calculé.

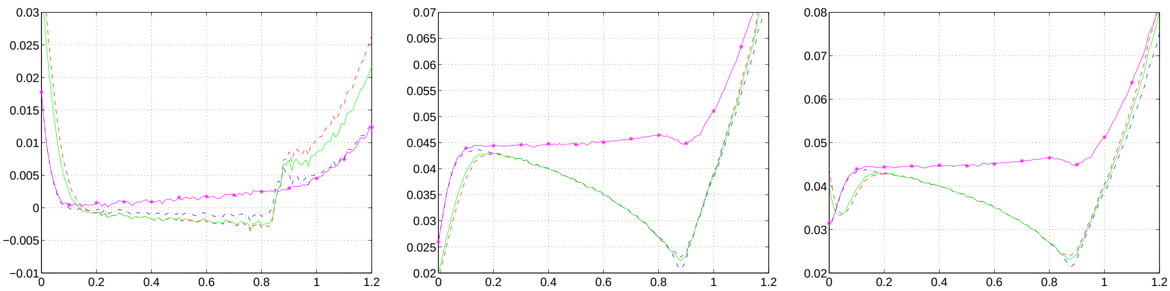

FIG. 1 – De gauche à droite : B, SD et SRMSE en fonction de la vraie valeur du paramètre entre 0 et 1.2. Trois estimateurs proposés : PMean (trait pointillé), PMed (trait plein) and PMax (trait mixte) et existant PVMax (trait étoilé).

L'évaluation est proposée pour une taille fixée ($N = 32$) et pour diverses valeurs du vrai paramètre $\beta^\star$ variant de $\beta^\star = 0$ à $\beta^\star = 1.2$. Elle repose sur trois indices : biais (B), écart-type (SD) et racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (SRMSE). Ils sont calculés grâce à une large étude de type Monte-Carlo de la manière suivante. Pour chaque valeur de $\beta^\star$, un grand nombre de configurations du champ $\boldsymbol{x}^{(k)}, k = 1, 2, \ldots, K$ est simulé (pratiquement $K =$

[2]Ce dernier est également le maximum de vraisemblance dans $[0, B]$.

10^5). Pour chaque configuration simulée, la densité a posteriori et la pseudo-vraisemblance sont calculées sur une grille de 1000 valeurs de β entre $\beta_\mathrm{m} = 0$ et $\beta_\mathrm{M} = 2$. Les quatre estimées sont alors numériquement approchées et les trois indices (B, SD et SRMSE) peuvent alors être calculés. Les résultats sont présentés sur la Fig. 1 et plusieurs éléments sont notables.

– On remarque que les trois estimateurs proposés ont des comportements voisins. Ce résultat est attendu puisqu'ils sont tous les trois fondés sur la même loi a posteriori unimodale.
– Au contraire, l'estimateur existant (PVMax) montre des performances largement moins bonnes. Il est clair que l'erreur SRMSE produite par PMean, PMed and PMax est toujours plus faible que celle produite par VMax. Il s'agit là du résultat principal : comme la contribution permet d'exploiter la vraisemblance exacte et non une forme approchée, les capacités d'extraire l'information des données sont accrues.
– Un point important concerne le comportement autour de la valeur critique. Nous avons vu précédemment que lorsque β approche β_c, $\bar{Z}''_P(\beta)$ devient grand et l'information de Fisher augmente. En consequence, la configuration observée est plus informative autour de β_c et SRMSE est naturellement réduit.

4 Conclusion

Ce papier propose une avancée dans les possibilités d'exploitation du champ de Ising. L'avancée repose sur une forme explicite de la fonction de partition connue depuis longtemps [1] mais, à notre connaissance, jamais exploitée pour estimer le paramètre du champ. Cette forme permet d'accéder à la vraisemblance exacte et de proposer plusieurs estimateurs : moyenne, médiane et maximiseur a posteriori (ce dernier est également le maximum de vraisemblance) concurrents de ceux bâtis sur la pseudo-vraisemblance. Les estimées sont comparées et l'étude montre que les estimateurs proposés surpassent largement l'existant.

Remerciements – Longue liste de collègues, pour longue marche : Jean–François BERCHER, Philippe CIUCIU, François ORIEUX, Olivier FÉRON, Thomas RODET, Xavier DESCOMBES...

Références

[1] L. Onsager, « A two-dimensional model with an order-disorder transition », *Phys. Rev.*, vol. 65, n°3 & 4, pp. 117–149, February 1944.

[2] S. Geman et D. Geman, « Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of images », *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, vol. 6, n°6, pp. 721–741, November 1984.

[3] A. Blake et A. Zisserman, *Visual reconstruction,* The MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1987.

[4] X. Descombes, R. Morris, J. Zerubia et M. Berthod, « Estimation of Markov random field prior parameters using Markov chain Monte Carlo maximum likelihood », *IEEE Trans. Image Processing*, vol. 8, n˚7, pp. 954–963, 1999.

[5] J. E. Besag, « On the statistical analysis of dirty pictures (with discussion) », *J. R. Statist. Soc. B*, vol. 48, n˚3, pp. 259–302, 1986.

[6] S. Geman et C. Graffigne, « Markov random field image models and their applications to computer vision. », in *Proceedings of the International Congress of Mathematicians*, Berkeley, California, USA, 1986, pp. 1496–1517.

[7] O. Féron, B. Duchêne et A. Mohammad-Djafari, « Microwave imaging of inhomogeneous objects made of a finite number of dielectric and conductive materials from experimental data », *Inverse Problems*, vol. 21, n˚6, pp. 95–115, december 2005.

[8] T. Vincent, L. Risser, P. Ciuciu et J. Idier, « Spatilaly unsupervised analysis of within-subject fMRI data using multiple extrapolations of 3D Ising field partition functions », in *Machine Learning for Signal Processing*, Grenoble, France, September 2009.

[9] G. Winkler, *Image Analysis, Random Fields and Markov Chain Monte Carlo Methods*, Springer Verlag, Berlin, Germany, 2003.

[10] J. Idier, Ed., *Bayesian Approach to Inverse Problems*, ISTE Ltd and John Wiley & Sons Inc., London, 2008.

[11] J.-F. Giovannelli, « Unsupervised bayesian convex deconvolution based on a field with an explicit partition function », *IEEE Trans. Image Processing*, vol. 17, n˚1, pp. 16–26, January 2008.

[12] K. Huang, *Statistical mechanics*, Wiley, New-York, USA, 1987.

[13] R. Chellappa et A. Jain, *Markov Random Fields : Theory and Application*, Academic Press Inc, 1992.

[14] J.-F. Giovannelli, « Estimation of the Ising model parameter using the field partition », Research Report, GPI–L2S, Gif-sur-Yvette, France, 2008.